

강의개요

단백질 구조 예측

- 주형 기반 모델링부터 AlphaFold까지

생체 분자의 기능은 그 구조와 밀접한 관련을 가진다. 단백질의 기능 또한 그 구조로부터 밝힐 수 있다. 따라서 X-선 결정학, 극저온 전자 현미경등 다양한 실험 기법들이 단백질의 구조를 밝히기 위해 널리 사용되고 있다. 그러나 실험을 통해 모든 구조를 결정하기에는 어려움이 있고, 아미노산 서열 규명에 비하여 높은 난이도를 가지므로, 이에 따라 sequence-structure gap이 발생하고 있다.

본 강의에서는 아미노산 서열로부터 단백질의 3차원 구조를 예측하는 방법에 대하여 학습한다. 2010년대 중반부까지 널리 사용되었던 주형 기반 모델링의 원리와 웹서버를 이용한 작동법을 익힌다. 또한 최근의 동향인 심층학습기반 단백질 구조 예측에 대하여 학습하고, Colab을 이용한 간단한 예측 방법에 대하여 실습한다.

강의는 다음의 내용을 포함한다:

- 단백질 구조 예측 이론
- Swiss-Model등 주형 기반 모델링
- AlphaFold등의 심층학습 기반 단백질 구조 예측

*참고강의교재:

없음

*교육생준비물:

노트북

* 강의 난이도: 초급

* 강의: 신웅희교수 (고려대학교 의료정보학과)

Curriculum Vitae

Speaker Name: Woong-Hee Shin, Ph.D.



► Personal Info

Name	Woong-Hee Shin
Title	Associate Professor
Affiliation	Korea University

► Contact Information

Address 161, Jeungneung-Ro, Seongbuk-Gu, Seoul, 02708
Email whshin@korea.ac.kr

Research interest : Computer-aided drug discovery, Protein design

Educational Experience

- 2008 B.S. in Chemistry, Seoul National University, Korea
2014 Ph.D. in Chemistry, Seoul National University, Korea

Professional Experience

- 2014-2019 Post-doc research fellow, Purdue University, USA
2019-2023 Assistant Professor, Department of Chemistry Education, Sunchon National University
2023- Associate Professor, Department of Biomedical Informatics, Korea University College of Medicine

Selected Publications (3 maximum)

1. Wonkyeong Jang and Woong-Hee Shin, CoBRA: Compound Binding Site Prediction using RNA Language Model, *Briefings in Bioinformatics*, In Press.
2. Jinung Song, Junsu Ha, Juyong Lee, Junsu Ko, and Woong-Hee Shin, Improving docking and virtual screening performance using AlphaFold2 multi-state modeling for kinases, *Scientific Reports*, 2024, 14, 25167.
3. Yiyu Hong, Junsu Ha, Chae-Jo Lim, Kwang-Seok Oh, Ramakrishna Chandrasekaran, Junsu Ko, Woong-Hee Shin, and Juyong Lee, Accurate Prediction of Protein-Ligand Interactions by Combining Physical Energy Function and Graph-Neural Networks, *Journal of Cheminformatics*, 2024, 16, 121.